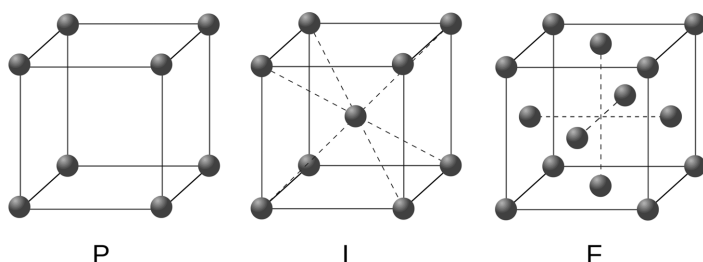


3.3. KRYSTALOVÉ SOUSTAVY VE 3D

3.3.1 Bravaisovy mříže

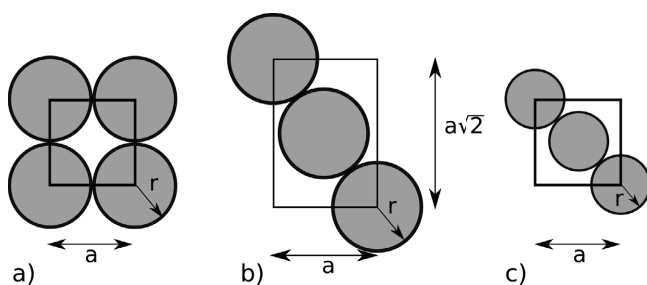
Dvacet let po odvození krystalografických tříd ukázal francouzský matematik Auguste Bravais (1811–1863), že 32 třídám a 7 soustavám odpovídá 14 typů mříží, v nichž je navíc zohledněna translace (tzv. centrování). Na obrázku 3.8 jsou uvedeny *kubické* Bravaisovy mříže – primitivní (P), prostorově centrovaná (I, *bcc* – body centered cube) a plošně centrovaná (F, *fcc* – face centered cube).



Obrázek 3.8: Kubické Bravaisovy mříže – prostá (primitivní), prostorově a plošně centrovaná.

Prostá neboli primitivní mříž má své označení podle počtu obsažených mřížových bodů. Primitivní mříž čítá vždy *jeden* mřížový bod. Každý z bodů, vyznačených na obrázku 3.8, zasahuje do mříže (krychle) jednou osminou³. Prostorově centrovaná kubická mříž obsahuje dva a kubická plošně centrovaná mříž celkem čtyři mřížové body.

Příklad: Pomocí modelu tuhých koulí určete zaplnění kubických Bravaisových mříží.



³V krystalu vytvořeném *teselací* elementárních mříží je jeden mřížový bod primitivní kubické mřížky *sdílen* 8 mřížemi.

Řešení: V modelu tuhých koulí předpokládáme, že mřížové body jsou obsazeny sférami, které se navzájem dotýkají. V případě prosté kubické mřížky jsou mřížové body v rozích krychle, viz obrázek a). Snadno odhadneme poloměr sféry v případě prosté kubické mřížky - $r = a/2$.

Zaplnění mříže je určeno podílem objemu sfér v mřížce k objemu mříže. V primitivní kubické mříži máme jeden mřížový bod, tj. jednu kouli a zaplnění prosté mříže p_P je tak

$$p_P = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\pi}{6} = 0,523.$$

Podobně vyřešíme zbývající Bravaisovy kubické mříže. V prostorově centrované mříži (obrázek b) jsou tři sféry podél *tělesové* úhlopříčky, tj. $r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$. Zaplnění *bcc* mříže p_I je

$$p_I = 2\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi = 0,680,$$

kde 2 před zlomkem značí počet mřížových bodů v prostorově centrované kubické mříži.

Plošně centrovaná kubická mříž obsahuje celkem 4 mřížové body. Poloměr sfér v modelu tuhých koulí lze odvodit z obrázku c), kde se podél *stěnové* úhlopříčky nacházejí 3 sféry, tj. $r = \frac{\sqrt{2}}{4}a$. Zaplnění *fcc* mříže je

$$p_F = 4\frac{\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi = 0,741.$$

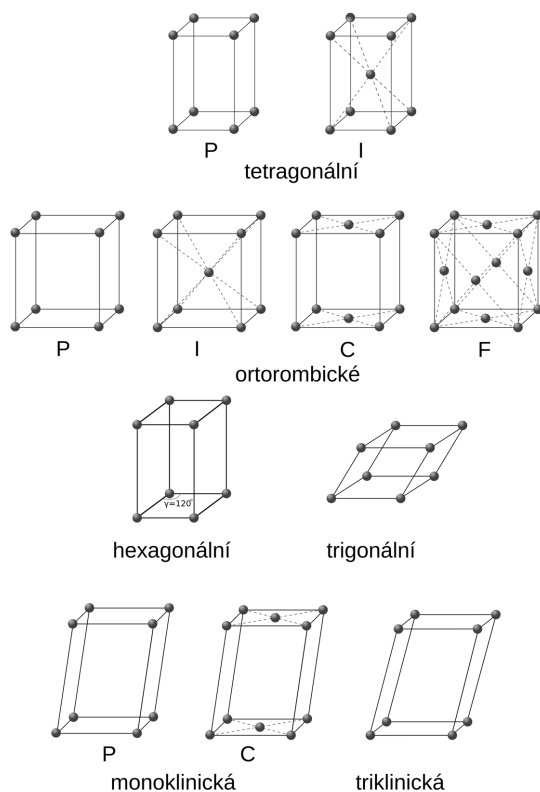
V přírodě převažují struktury s větším zaplněním. Mezi prvky, které krystalizují v kubické soustavě, nalezneme 20 s plošně centrovanou mříží, 13 s prostorově centrovanou, ale ani jeden s primitivní mříží.

Zbývající Bravaisovy mříže jsou uvedeny na obrázku 3.9. Všimněte si, že centrované mohou být i jiné mříže, než kubické.

3.3.2 Prostorové grupy

Bravaisovy mříže se vztahují ke *geometrii* elementární mříže. Struktura krystalu je však dána nejen geometrií mříže, ale i tím, jak jsou v této mříži umístěny atomy, tedy tzv. *hmotnou bází*. Atomy nelze z důvodů symetrie elementární mříže umístit libovolně. Například v kubické mříži operace symetrie „automaticky zkopírují“ atom umístěný do jednoho

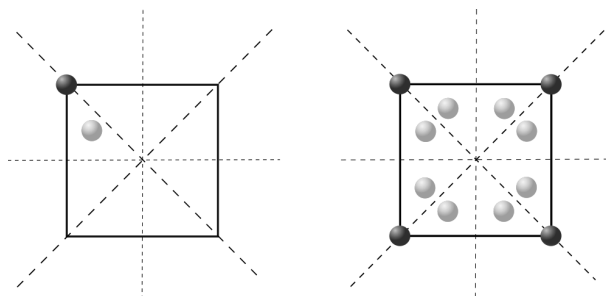
3.3. KRYSTALOVÉ SOUSTAVY VE 3D



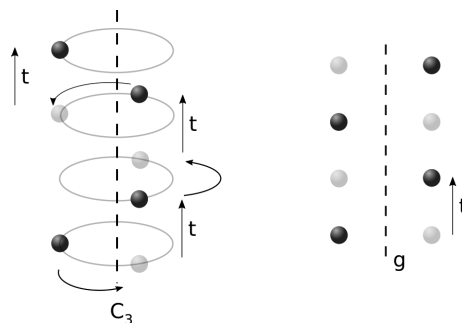
Obrázek 3.9: Bravaisovy mřížky soustavy tetragonální, ortorombické, monoklinické, triklinické, hexagonální a trigonální.

rohu krychle do ostatních rohů, atom umístěný do středu jedné stěny bude operacemi symetrie zobrazen do středu ostatních stěn. Tyto polohy se nazývají *symetricky ekvivalentní*. Například poloha atomu v rohu krychle $(0, 0, 0)$ je symetricky ekvivalentní s polohami (a, a, a) , $(0, 0, a)$, $(a, a, 0)$ atd., viz obrázek 3.10.

Polohy atomů v elementární mříži jsou ovlivněny symetrií mříže. Počet způsobů, jakým lze do čtrnácti Bravaisových mříží umístit hmotnou bázi je omezený. Nezávisle na sobě je odvodili matematici Jevgraf Stěpanovič Fjodorov (1853–1919) a Arthur Schönflies (1853–1928). Celkem je jich 230 a nazýváme je *prostorové grupy*. Již známé prvky symetrie (rotační osa, inverze, inverzně–rotační osa, rovina zrcadlení, reflexně–rotační osa) jsou rozšířeny o *translaci* a složené prvky s ní spojené – *šroubová osa* a *skluzová rovina* (obr.3.11).



Obrázek 3.10: Symetrické polohy ve čtvercové mřížce. Operace symetrie zobrazí atomy umístěné do poloh na levém obrázku do všech symetricky ekvivalentních poloh – obrázek vpravo.



Obrázek 3.11: Složené prvky symetrie s translací. Vlevo – šroubová trojčetná osa. Otočení o 120° je následováno translací t . Vpravo – skluzová rovina. Po operaci zrcadlení je provedena operace translace t . Skluzová rovina se označuje písmenem g .

Všech 230 prostorových grup je popsáno v Mezinárodních krystalografických tabulkách [38]. Obrázek 3.12 dává nahlédnout na část informací o prostorové grupě číslo 225 s označením $Fm\bar{3}m$. Jedná se o prostorovou grupu kubické soustavy. Písmeno F značí plošně centrovanou mříž. První znak odkazuje k symetrii podél směru hrany krychle, druhý ve směru tělesové úhlopříčky a třetí znak ve směru úhlopříčky podstavy. U ostatních soustav (tetragonální, ortorombická, ...) platí podobná pravidla psaní označení symetrií ve význačných směrech v symbolech prostorových grup.

Na obrázku 3.12 jsou uvedeny polohy, které mohou být obsazeny atomy. Ty mají svá označení, například první poloha odspodu nese označení $4a$. Číslo značí její *četnost*, písmeno určuje pořadí polohy (od nejméně

3.3. KRYSTALOVÉ SOUSTAVY VE 3D

$Fm\bar{3}m$
 O_h^5

No. 225

$F 4/m \bar{3} 2/m$

$m \bar{3} m$ Cubic

Origin at centre ($m\bar{3}m$)

Number of positions,
Wyckoff notation,
and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

Conditions limiting
possible reflections

$(0,0,0; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) +$

General:

$hkl: h+k, k+l, (l+h)=2n$

$hhl: (l+h=2n); \odot$

$Ok!: (k, l=2n); \odot$

192	l	1	$x, y, z;$ $x, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, \bar{z};$ $\bar{x}, \bar{y}, z;$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$ $\bar{x}, y, z;$ $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z};$	$z, x, y;$ $z, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, \bar{y};$ $\bar{z}, \bar{x}, y;$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$ $\bar{z}, x, y;$ $\bar{z}, \bar{x}, \bar{y};$	$y, z, x;$ $y, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, \bar{x};$ $\bar{y}, \bar{z}, x;$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{y}, z, x;$ $\bar{y}, \bar{z}, \bar{x};$	$x, z, y;$ $x, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, \bar{y};$ $\bar{x}, \bar{z}, y;$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$ $\bar{x}, z, y;$ $\bar{x}, \bar{z}, \bar{y};$	$y, x, z;$ $y, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, \bar{z};$ $\bar{y}, \bar{x}, z;$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$ $\bar{y}, x, z;$ $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z};$	$z, y, x;$ $z, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, \bar{x};$ $\bar{z}, \bar{y}, x;$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$ $\bar{z}, y, x;$ $\bar{z}, \bar{y}, \bar{x};$
-----	-----	---	--	--	--	--	--	--

Special: as above, plus

96	k	m	$x, x, x;$ $x, \bar{x}, \bar{x};$ $\bar{x}, x, \bar{x};$ $\bar{x}, \bar{x}, x;$	$z, z, z;$ $z, \bar{z}, \bar{z};$ $\bar{z}, z, \bar{z};$ $\bar{z}, \bar{z}, z;$	$x, z, x;$ $x, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{x}, z, \bar{x};$ $\bar{x}, \bar{z}, x;$	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{x};$ $\bar{x}, x, x;$ $\bar{x}, \bar{x}, x;$ $\bar{x}, x, \bar{x};$	$\bar{z}, \bar{z}, \bar{z};$ $\bar{z}, x, x;$ $\bar{z}, \bar{z}, x;$ $\bar{z}, x, \bar{z};$	$\bar{x}, \bar{z}, \bar{x};$ $\bar{x}, z, x;$ $\bar{x}, \bar{z}, x;$ $\bar{x}, z, \bar{x};$
----	-----	-----	--	--	--	--	--	--

96	j	m	$0, y, z;$ $0, \bar{y}, \bar{z};$ $0, y, \bar{z};$ $0, \bar{y}, z;$	$z, 0, y;$ $z, 0, \bar{y};$ $\bar{z}, 0, y;$ $\bar{z}, 0, \bar{y};$	$y, z, 0;$ $y, \bar{z}, 0;$ $\bar{y}, z, 0;$ $\bar{y}, \bar{z}, 0;$	$0, z, y;$ $0, \bar{z}, \bar{y};$ $0, z, \bar{y};$ $0, \bar{z}, y;$	$y, 0, z;$ $y, 0, \bar{z};$ $\bar{y}, 0, z;$ $\bar{y}, 0, \bar{z};$	$z, y, 0;$ $z, \bar{y}, 0;$ $\bar{z}, y, 0;$ $\bar{z}, \bar{y}, 0;$
----	-----	-----	--	--	--	--	--	--

no extra conditions

48	i	mm	$\frac{1}{2}, x, x;$ $\frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{x};$	$x, \frac{1}{2}, x;$ $\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{x};$	$x, x, \frac{1}{2};$ $\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2};$	$\frac{1}{2}, x, \bar{x};$ $\frac{1}{2}, \bar{x}, x;$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, x;$ $x, \frac{1}{2}, \bar{x};$	$x, \bar{x}, \frac{1}{2};$ $\bar{x}, x, \frac{1}{2};$
----	-----	------	--	--	--	--	--	--

48	h	mm	$0, x, x;$ $0, \bar{x}, \bar{x};$	$x, 0, x;$ $\bar{x}, 0, \bar{x};$	$x, x, 0;$ $\bar{x}, \bar{x}, 0;$	$0, x, \bar{x};$ $0, \bar{x}, x;$	$\bar{x}, 0, x;$ $x, 0, \bar{x};$	$x, \bar{x}, 0;$ $\bar{x}, x, 0;$
----	-----	------	--------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------	--------------------------------------

48	g	mm	$x, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$ $\bar{x}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$	$\frac{1}{4}, x, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, \bar{x}, \frac{1}{4};$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, x;$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \bar{x};$	$x, \frac{1}{4}, \frac{3}{4};$ $\bar{x}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4};$	$\frac{3}{4}, x, \frac{1}{4};$ $\frac{3}{4}, \bar{x}, \frac{1}{4};$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, x;$ $\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \bar{x};$
----	-----	------	--	--	--	--	--	--

$hkl: h, (k, l)=2n$

32	f	$3m$	$x, x, x;$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{x};$	$x, \bar{x}, \bar{x};$ $\bar{x}, x, x;$	$\bar{x}, x, \bar{x};$ $x, \bar{x}, x;$	$\bar{x}, \bar{x}, x;$ $x, x, \bar{x};$
----	-----	------	--	--	--	--

no extra conditions

24	e	$4mm$	$x, 0, 0;$ $0, x, 0;$ $0, 0, x;$	$0, x, 0;$ $0, 0, x;$ $0, 0, \bar{x};$	$\bar{x}, 0, 0;$ $0, \bar{x}, 0;$ $0, 0, \bar{x};$
----	-----	-------	--	--	--

24	d	mmm	$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0;$	$\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0;$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0;$	$0, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4};$ $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0;$
----	-----	-------	--	--	--

$hkl: h, (k, l)=2n$

8	c	$\bar{4}3m$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4};$ $\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4};$
---	-----	-------------	--

4	b	$m\bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2};$
---	-----	-------------	--

no extra conditions

4	a	$m\bar{3}m$	$0, 0, 0;$
---	-----	-------------	------------

Obrázek 3.12: Část informací o prostorové grupě $Fm\bar{3}m$ z Mezinárodních krystalografických tabulek [38].

Tabulka 3.3: Přehled 2D a 3D mříží.

	2D	3D
krystalografické třídy	4	7
Bravaisovy mříže	5	14
bodové grupy mříží	10	32
prostorové grupy	17	230

k nejvíce čtým). V našem případě je poloha atomu v poloze $4a$ $(0, 0, 0)$. Další možné polohy jsou dány *translacemi*, uvedenými na začátku tabulky pod označením „Co-ordinates of equivalent positions“ – $(0, 0, 0)$, $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. Atom v poloze $4a$ se translacemi zobrazí do čtyř symetricky ekvivalentních poloh:

$$\begin{aligned}
 (0, 0, 0) + (0, 0, 0) &= (0, 0, 0) \\
 (0, 0, 0) + (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) &= (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \\
 (0, 0, 0) + (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) &= (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) \\
 (0, 0, 0) + (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0) &= (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0).
 \end{aligned}$$

Uvedené translace jsou platné pro *všechny* možné polohy v prostorové grupě $Fm\bar{3}m$. Před názvem krystalové soustavy (Cubic) je uvedena bodová grupa mřížky, $m\bar{3}m$.

V tabulce 3.3 jsou shrnuty počty krystalových tříd, bodových a prostorových grup pro krystalické mříže pro dvou- a trojrozměrný prostor.

3.4 Symetrie a vlastnosti látek

S tím, že struktura ovlivňuje vlastnosti, jsme se již setkali u molekul (například stáčení roviny polarizovaného světla, přítomnost dipólového momentu, chiralita ...) Shodně tomu bude i u krystalů, tj. pravidelně uspořádaných látek. Také zde popisujeme vlastnosti pomocí fyzikálních veličin. Ty mohou být skalární (hustota, tlak, teplota), vektorové (tepelný gradient, polarizace, magnetizace) nebo tenzorové (tenzor elektrické vodivosti, tenzor elastické deformace, ...).

3.4. SYMETRIE A VLASTNOSTI LÁTEK

Například Ohmův zákon zapsaný v tenzorovém tvaru vypadá takto

$$\vec{j} = \hat{\sigma} \vec{E},$$

nebo-li

$$\begin{pmatrix} j_1 \\ j_2 \\ j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{21} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix}, \quad (3.3)$$

kde $\vec{j}$ a $\vec{E}$ jsou vektory proudové hustoty a elektrického pole, $\hat{\sigma}$ označuje *tenzor* elektrické vodivosti. Pro vektor elektrického pole $\vec{E} = (E_1, 0, 0)$ dostaneme po dosazení do 3.3 vektor proudové hustoty

$$\vec{j} = (\sigma_{11}E_1, \sigma_{12}E_1, \sigma_{13}E_1),$$

tj. vektor elektrického pole je obecně *nekolineární* s vektorem $\vec{j}$.

V reálném experimentu můžeme měřit hodnotu fyzikální veličiny ve zvoleném směru. V případě vektorových veličin je naměřená hodnota dána *průmětem* vektoru veličiny do daného směru, tj. skalárním součinem s jednotkovým vektorem v měřeném směru.

V případě tenzorů je postup obdobný. Mějme vektorové veličiny $\vec{p}$ a $\vec{q}$, pro které platí vztah $\vec{p} = \hat{T}\vec{q}$, kde $\hat{T}$ je tenzor. Obecně lze vyjádřit i -tou složku vektorové veličiny $\vec{p}$ vztahem (viz vztah 3.3)

$$p_i = \sum_k T_{ik} q_k. \quad (3.4)$$

Hodnotu $\vec{p}$ ve směru $\vec{q}$ určíme ze skalárního součinu $\vec{p}$ s jednotkovým vektorem ve směru $\vec{q}$, $\vec{e}_{\vec{q}}$,

$$p_{\parallel} = \vec{p} \cdot \vec{e}_{\vec{q}}. \quad (3.5)$$

Hodnota veličiny popsané tenzorem $\hat{T}$ ve směru $\vec{q}$ je vyjádřena vztahem

$$\hat{T}_{\vec{q}} = \frac{p_{\parallel}}{q}, \quad (3.6)$$

kde q je velikost $\vec{q}$. Složky vektoru $p_{\parallel}$ 3.5 můžeme zapsat pomocí složek p_i (rovnice 3.4),

$$p_{\parallel} = \sum_i \sum_k T_{ik} q_k e_{i,\vec{q}}. \quad (3.7)$$

Výsledek 3.7 dosadíme do 3.6 a po úpravě dostaneme

$$\hat{T}_{\vec{q}} = \frac{\sum_i \sum_k T_{ik} q_k e_{i,\vec{q}}}{q} = \sum_i \sum_k c_i T_{ik} c_k, \quad (3.8)$$

kde $c_i = e_{i,\vec{q}}$ a $c_k = q_k/k$ jsou směrové kosiny. Pokud známe směrové kosiny c_i a tenzor $\hat{T}$ je symetrický, má $\hat{T}_{\vec{q}}$ tvar

$$\hat{T}_{\vec{q}} = T_{11}c_1^2 + T_{22}c_2^2 + T_{33}c_3^2 + 2T_{12}c_1c_2 + 2T_{13}c_1c_3 + 2T_{23}c_2c_3. \quad (3.9)$$

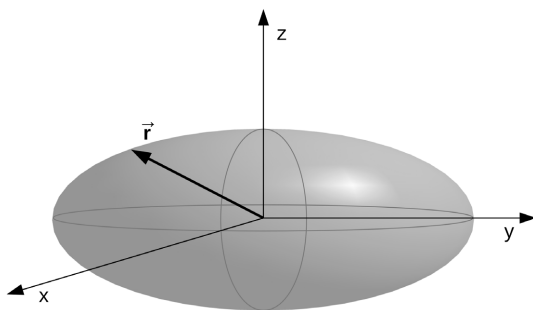
Rovnice 3.8 připomíná rovnici *kvadriky* tenzoru

$$\sum_i \sum_k x_i T_{ik} q_k x_k = 1, \quad (3.10)$$

což je plocha druhého řádu. Zavedeme-li sférické souřadnice, tak pro směrové kosiny platí $x_i = r \cdot c_i$. Po dosazení do 3.10 máme

$$r^2 \sum_i \sum_k c_i T_{ik} q_k c_k = 1 \rightarrow r = \frac{1}{\sqrt{\hat{T}_{\vec{r}}}}. \quad (3.11)$$

Jsou-li $T_{ii} > 0$ je kvadrika tenzoru rotačním elipsoidem. Vzdálenost bodu na tomto elipsoidu od počátku souřadnic je *nepřímo úměrná* odmocnině hodnoty veličiny popsané tenzorem $\hat{T}$ ve směru r (rovnice 3.11), jak je schématicky ukázáno na obrázku 3.13. Symetrie kvadriky určuje symetrii fyzikální veličiny vyjádřené tenzorem $\hat{T}$.



Obrázek 3.13: Kvadrika tenzoru. Délka vektoru $\vec{r}$ je nepřímo úměrná druhé odmocnině hodnoty fyzikální veličiny popsané tenzorem $\hat{T}$ ve směru $\vec{r}$.

K symetrii vnějšího tvaru krystalů (32 prostorovým bodovým grupám, viz str.162) a jejich vlastnostem se váží následující tři principy: